

[Ejercicio]

- Mide la longitud del espectro experimental y anótala.
- Mide en el espectro experimental la constante de acoplamiento menor y anótala.
- Suponiendo que dicha constante corresponde a los átomos de nitrógeno, utiliza la longitud del espectro medida anteriormente y la Ec. (8) para obtener la constante correspondiente a los átomos de flúor.
- Simula el espectro con dichas constantes e imprime el resultado (simulación 1) con el árbol de desdoblamientos sucesivos.
- Ahora supongamos que la constante menor corresponde a los átomos de flúor, utiliza la longitud del espectro experimental y la Ec. (8) para obtener la constante correspondiente a los átomos de nitrógeno.
- Simula el espectro con las constantes obtenidas, refinalas si es necesario e imprime el resultado (simulación 2) con el árbol de desdoblamientos sucesivos.
- Indica en la tabla cuál simulación es la correcta y completa los datos correspondientes a dicha simulación.
- Observa la reconstrucción por desdoblamientos sucesivos del espectro simulado correcto y anota cuáles son las 6 líneas del espectro experimental que suman sus intensidades (solapan).
- Realiza una tercera simulación (simulación 3) intercambiando las constantes obtenidas en la simulación correcta, es decir, la constante de los átomos de flúor se la asignamos a los nitrógenos y viceversa.
- Imprime esta simulación 3 con el árbol de desdoblamientos sucesivos. Observa como la parte central del espectro se parece a la simulación correcta. De hecho esa similitud ha ocasionado que algunos autores hayan interpretado de manera equivocada este espectro.
- Mide la longitud y el número de líneas de la simulación correcta y de la simulación 3 y anótalas en la tabla.
- Numera todas las líneas del espectro simulado correcto y marca sobre él la líneas centrales de los cinco septetes que dan lugar al quintete originado por el acoplamiento con los nitrógenos. Mide y anota en la tabla las alturas de estas cinco líneas.
- Numera todas las líneas del espectro simulado 3 y marca sobre él la líneas centrales de los siete quintetes que dan lugar al septete originado por el acoplamiento con los flúor. Mide y anota en la tabla las alturas de estas siete líneas.
- Completa la tabla y adjunta el resultado y las tres simulaciones en el guión de prácticas.

Tabla de simulaciones del anión radical semidiazóxido del bis (trifluormetilo) [a025].

L (espectro experimental) = mT.

Valor de la constante menor medida en el espectro experimental : mT.

Simulación correcta 1 2 (tacha la que no proceda) N (espectro) = líneas. L (espectro) = mT.

Intensidades del quintete y posiciones de las líneas					
	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....
Pixels					
Normalizadas ^a					
Teórica ^b					

Simulación 3

N (espectro) = líneas.

L (espectro) = mT.

Intensidades del septete y posiciones de las líneas							
	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....	Línea-.....
Pixels							
Normalizadas ^a							
Teórica ^b							

^a Normaliza las intensidades de manera que la más pequeña valga la unidad.

^b Escribe las intensidades teóricas.